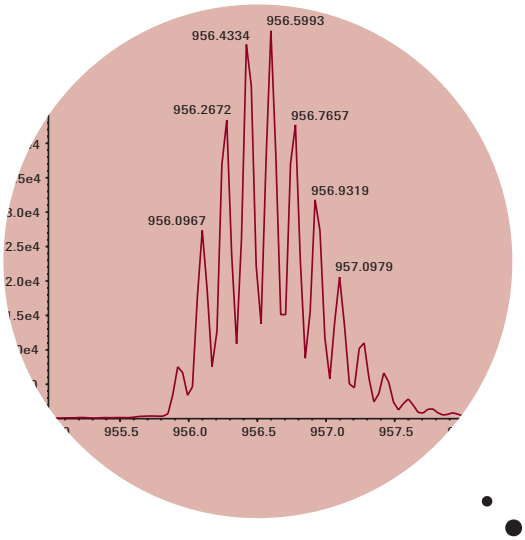
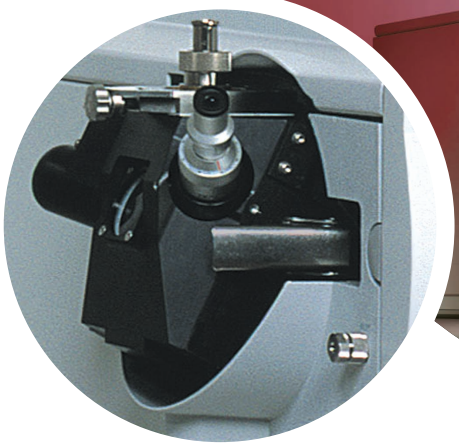


LC/MSD TOF Agilent

Convirtiendo en rutina la obtención de masas exactas



Agilent Technologies

La garantía de la masa exacta, convertida en rutina

Cuando los químicos generan nuevos compuestos, necesitan determinar rápidamente si han obtenido los productos que están intentando sintetizar. La medida de la masa exacta puede proporcionar pesos moleculares y composición elemental para una identificación con garantía. Pero la obtención de la información de la masa exacta tradicionalmente ha resultado complicada. Nunca más. El nuevo LC/MSD TOF de Agilent, espectrómetro de masas de tiempo de vuelo, convierte la obtención de información exacta de las masas en un procedimiento rutinario.

El LC/ MSD TOF de Agilent combina la capacidad de medición de masas exactas con la facilidad de uso de un espectrómetro de masas de un cuadrupolo. El LC/ MSD TOF de Agilent incorpora:

- Sensibilidad, resolución y exactitud de masa
- Amplio rango dinámico
- Uso transparente del patrón de referencia
- Barrido rápido
- Múltiples opciones de ionización
- Software de control de instrumentos y adquisición de datos totalmente nuevo.
- Servicio y soporte Agilent en el mundo entero

La garantía de la masa exacta

El LC/MSD TOF de Agilent se diseñó partiendo de cero hasta proporcionar una sensibilidad a nivel de bajos femtomoles, un poder de resolución de 10.000 y 3 ppm de exactitud en las masas, todo ello con fiabilidad y una dificultad mínima. Esta extraordinaria eficacia proporciona la confianza extra necesaria para la publicación o solicitud de patentes.

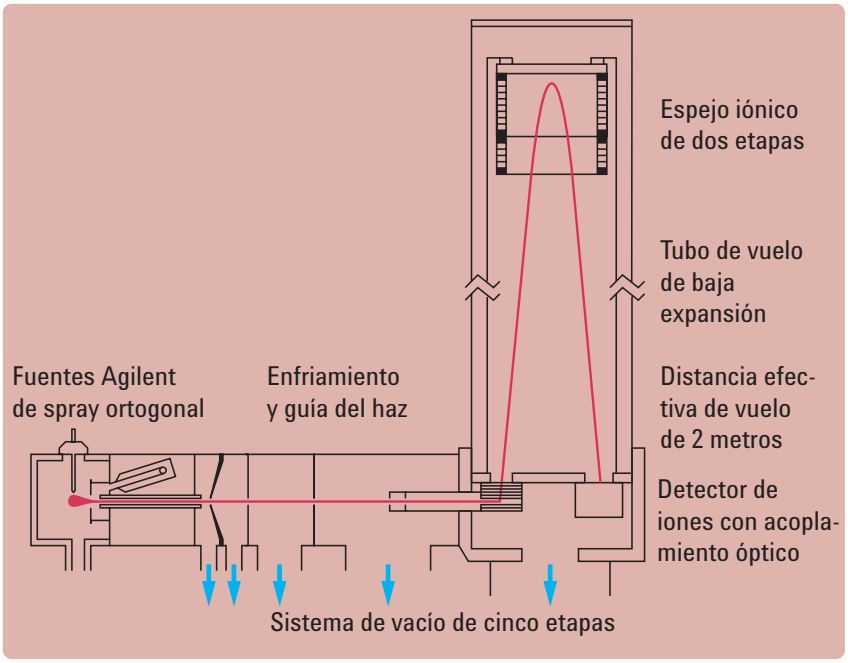
El amplio rango dinámico permite su utilización en más aplicaciones

El reducido rango dinámico ha sido tradicionalmente una gran limitación para la aplicación de la MS TOF.

El LC/MSD TOF de Agilent utiliza un innovador sistema de adquisición que elimina la necesidad de la corrección de tiempo muerto; proporcionando hasta tres órdenes de magnitud de rango dinámico.

El excepcional rango dinámico elimina la necesidad de la coincidencia entre las concentraciones de la masa de referencia interna y la de la muestra. Puede introducirse una masa de referencia a menor concentración para disminuir el riesgo de supresión o interferencia. El rango dinámico amplio también facilita un acceso “walk-up” sin vigilancia.

Un diseño mecánico innovador contribuye a una eficacia excepcional


Espejo iónico de dos etapas
Tubo de vuelo de baja expansión
Fuentes Agilent de spray ortogonal
Enfriamiento y guía del haz
Distancia efectiva de vuelo de 2 metros
Detector de iones con acoplamiento óptico
Sistema de vacío de cinco etapas

Portada: El espectro de masas del ion de carga molecular +6 de 5 pmol de insulina, demuestra la extraordinaria resolución del LC/MSD TOF

La exactitud de un patrón interno con la simplicidad de un patrón externo

Los usuarios de equipos TOF en ocasiones renuncian a la exactitud de los patrones internos a causa de las dificultades para la introducción de masas de referencia y de la coincidencia de la intensidad de la señal. Esto no ocurre con el LC/MSD TOF. Con su amplio rango dinámico, su fuente de ionización de spray doble y con el sistema de suministro de compuestos de calibración (calibrant delivery system, CDS) automatizado, el LC/MSD TOF facilita tanto la utilización de un patrón interno que la hace casi transparente. Incluso la corrección de masa tiene lugar de forma automática en tiempo real. Todos los espectros registrados son exactos y están listos para el procesado de datos.

Barrido rápido para cromatografía rápida y alta eficacia

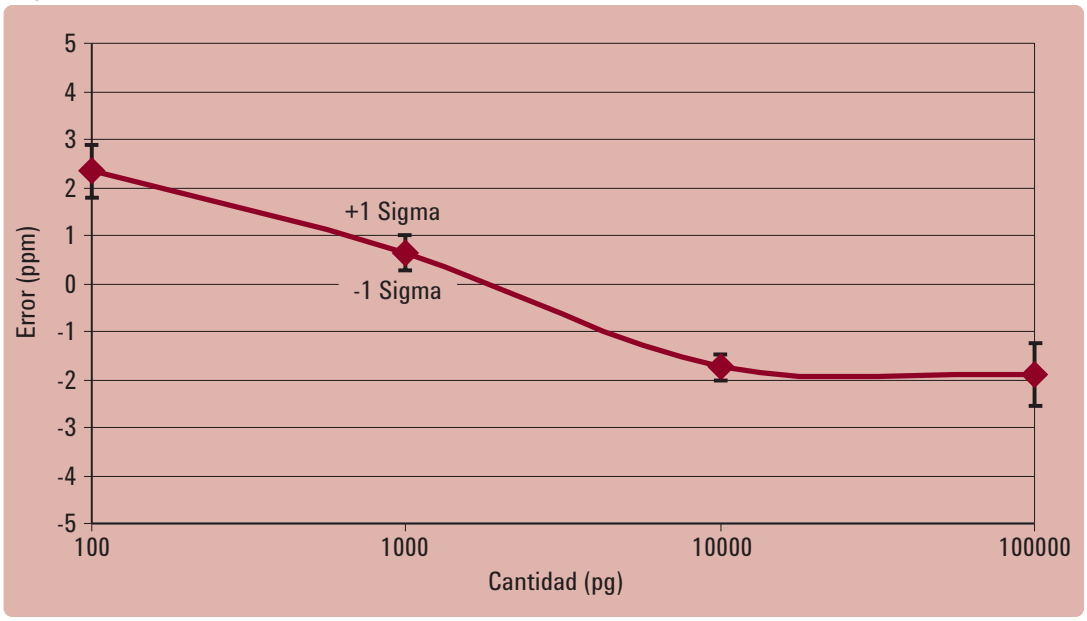
El análisis a gran escala requiere una cromatografía rápida. A un ritmo de 5 a 10 barridos por segundo en un amplio rango de masas, el LC/MSD TOF puede adquirir una gran cantidad de espectros incluso a partir de anchuras de pico reducidas de unos dos segundos producidas por cromatografía rápida y columnas de diámetro estrecho.

Opciones de ionización para un amplio rango de aplicaciones

El LC/MSD TOF es compatible con un amplio rango de opciones de ionización incluyendo:

- **Electrospray**: la fuente de spray doble permite flujos de LC de hasta 1,0 mL/min
- **Nanospray**: el nuevo diseño de spray ortogonal proporciona la máxima sensibilidad, es más fácil de instalar y operativamente más estable
- **APCI**: una excelente alternativa para compuestos que no responden bien al electrospray
- **AP-MALDI**: una alternativa rápida, sencilla y muy sensible para compuestos que no requieren una separación por LC en línea

Los resultados de 5 inyecciones de 100, 1000, 10000 y 100000 pg de reserpina respectivamente —a niveles iguales o inferiores a los encontrados habitualmente en la confirmación de síntesis,—demuestra una exactitud de masa mejor que 3 ppm en un rango dinámico de tres órdenes de magnitud.



Nuevo software basado en TOF

El software de control y adquisición de datos de los equipos LC/MSD TOF es totalmente nuevo. Este paquete, basado en Windows® 32-bits, simplifica la instalación, el control y la adquisición de datos con el LC/MSD TOF, incluyendo:

- Una sola ventana y un visor de optimización de parámetros para un desarrollo de métodos más sencillo
- Un editor de secuencias basado en una hoja de cálculo para una configuración rápida y sencilla de muestras
- Cálculo preciso del centroide de las masas para una exactitud excelente en la medida de masa sin ajuste del umbral
- Soporte para masas de referencia sencillas y múltiples
- Corrección de masa automatizada antes de que el espectro sea almacenado en el disco
- Soporte para experimentos CID en la fuente
- Puntos de ajuste de los parámetros de MS y HPLC programables

El software de control del equipo y de adquisición de datos está basado en Visual Basic para aplicaciones (VBA). El usuario puede personalizar la adquisición y el proceso de datos utilizando scripts VBA estándar.

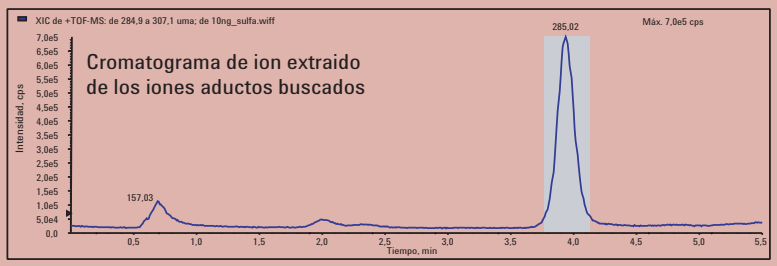
El análisis de los datos lo realiza el software contrastado Analyst QS de AB/MDS-SCIEX, con potentes complementos de Agilent, específicos para la aplicación.

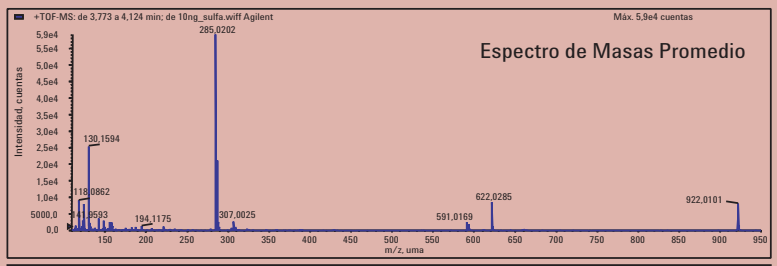
Uno de los complementos, el programa de confirmación de la fórmula empírica, confirma automáticamente la presencia del compuesto esperado. Partiendo de una fórmula empírica, revisa los espectros extraídos buscando las masas esperadas. Puede considerar las pérdidas neutras, aductos y otras modificaciones habituales.

Otro complemento específico de la aplicación es el almacenamiento de los parámetros activos de MS a lo largo del análisis completo junto con el espectro correspondiente.

Informe de confirmación de la fórmula empírica Página 1 de 1

Fórmula empírica: ***C10H9ClN4O2S*** Masa exacta: ***284,01347*** Nombre muestra: ***10 ng sulfa*** ID muestra:
Archivo datos: ***p:\Projects\sulfa 2\Data\10ng sulfa.wiff*** Momento adquisición: ***May 08 2003, 12:05:38 PM***





Especie	Abundancia (cuentas)	Masa buscada (uma)	Masa medida (uma)	Error en la masa (m/z)	Error en la masa (ppm)
[M+H]+	59329,42	285,02075	285,02019	–,00056	–1,97
[M+Na]+	2799,10	307,00270	307,00248	–,00021	–,70

Página 1 de 1 Jueves, 8 de mayo de 2003

Servicio y soporte con alcance global pero con respuesta local

Agilent se ha ganado la reputación de tener una de las mejores organizaciones de servicio y soporte de la industria analítica. Nuestra sofisticada tecnología de comunicaciones e infraestructura nos permiten operar sin problemas en más de cuarenta países; de este modo podemos ofrecerle soporte allí donde se encuentre. Y nuestra perspectiva global no nos impide responder al menor detalle local.

Para más información

Para más información sobre el LC/MSD TOF u otros productos y servicios, llame a su oficina de venta local de Agilent Technologies o a su distribuidor autorizado de Agilent Technologies.

También puede visitarnos en la web:

www.agilent.com/chem

Los productos de biociencia de Agilent Technologies están diseñados y fabricados según un sistema de calidad con certificado ISO 9001.

La información, descripciones y especificaciones de esta publicación están sujetas a cambios sin previo aviso.

(c) Agilent Technologies, Inc. 2003

Impreso en Holanda. 1 de Septiembre 2003
5988-9597ES

Agilent Technologies